



Neutronspreddning for begyndere

Hansen, P.Å.; Møllenbach, K.; Warming, Inge Elisabeth

Publication date:
1976

Document Version
Publisher's PDF, also known as Version of record

[Link back to DTU Orbit](#)

Citation (APA):
Hansen, P. Å., Møllenbach, K., & Warming, I. E. (1976). *Neutronspreddning for begyndere*. Risø National Laboratory. Risø-M No. 1854

General rights

Copyright and moral rights for the publications made accessible in the public portal are retained by the authors and/or other copyright owners and it is a condition of accessing publications that users recognise and abide by the legal requirements associated with these rights.

- Users may download and print one copy of any publication from the public portal for the purpose of private study or research.
- You may not further distribute the material or use it for any profit-making activity or commercial gain
- You may freely distribute the URL identifying the publication in the public portal

If you believe that this document breaches copyright please contact us providing details, and we will remove access to the work immediately and investigate your claim.

ISBN 87-550-0386-9

INDHOLD

	Side
1. Indledning	2
2. Elastisk spredning	8
2.1 Nukleær spredning	8
2.2 Magnetisk spredning	15
3. Uelastisk spredning	17
3.1 Fononer	17
3.2 Magnoner	23
4. Det eksperimentelle udstyr	26
4.1 Monokromator systemet	26
4.2 Fordelingen af de udvalgte k_0	28
4.3 Højere ordens kontaminering	30
4.4 Toaksespektrometret	31
4.5 Treaksespektrometret	33
4.6 Spektrometerstyring	34
4.7 Toaksespektrometrets opløsningsevne	34
5. Referencer	37

1. INDLEDNING

Ved fissionsprocessen i en reaktor udsendes der neutroner med en energi på ca. 10 MeV. Gennem sammenstød med atomkerner i reaktorens moderator nedbremses neutronerne, og neutronerne når til termisk ligevægt med omgivelserne. Neutronfluksen $N(k)$ er da

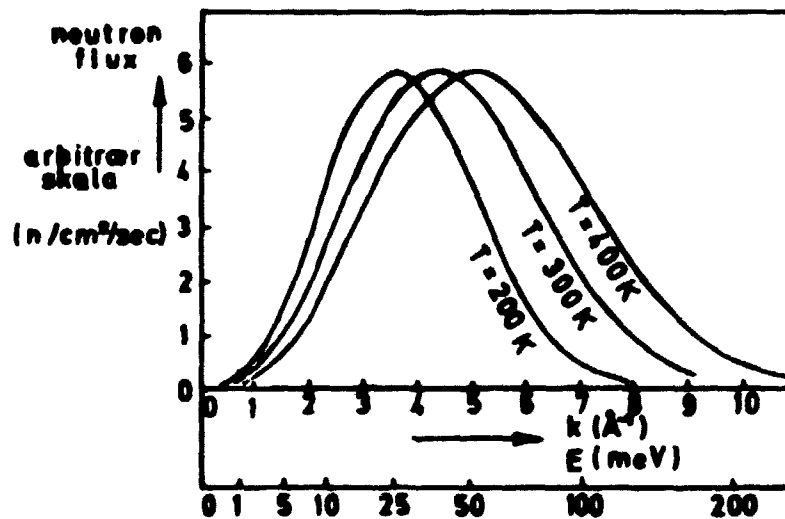


Fig. 1.1 Maxwell fordeling ved forskellige temperaturer.

en Maxwell fordeling.

$$N(k) = n \frac{4\pi\hbar^4}{m} \left(\frac{1}{2\pi k_B T m} \right)^{3/2} k^3 \exp\left(-\frac{\hbar^2 k^2}{k_B T 2m}\right)$$

(1.1)

$$N(E) = n 8\pi^3 \left(\frac{\pi}{\hbar k_B T} \right)^{3/2} E^{3/2} \exp\left(-\frac{E}{k_B T}\right)$$

k er neutronens bølgevektor og E er neutronens energi ($E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$), m er neutronens masse, k_B er Boltzmanns konstant og T den absolutte temperatur (der er her set bort fra moderatorens absorption af neutroner, hvilket er rimeligt p.g.a. de valgte moderatormaterialer). Fissionsneutronerne kaldes hurtige neutroner, mens de nedbremsede med energier på 5-100 meV kaldes langsomme eller termiske neutroner.

Termiske neutroner er et enestående værktøj til undersøgelse af faste, flydende og gasformige stoffer, fordi:

- 1) Termiske neutroners bølgelængde er sammenlignelig med atomafstanden i faste stoffer.
- 2) Energien af excitationer (fononer, magnoner, --) i stofferne, som undersøges ved uelastisk spredning, er sammenlignelig med de termiske neutroners energi.
- 3) Neutronen er ladningsfri og trænger derfor ind i materialerne uden Coulomb vekselvirkning.
- 4) Neutronen har et magnetisk moment, som vil vekselvirke med det magnetiske moment af materialets elektroner (de uparrede elektroner).

Energi	E	25 meV
Hastighed	$v = (\frac{2E}{m})^{\frac{1}{2}}$	2.2×10^3 m/sec
Bølgelængde	$\lambda = (\frac{2\pi^2 \hbar^2}{mE})^{\frac{1}{2}}$	1.81 Å
Bølgevektor	$k = \frac{2\pi}{\lambda} = (\frac{2mE}{\hbar^2})^{\frac{1}{2}}$	3.47 Å^{-1}
Temperatur	$T = \frac{E}{k_B}$	290 K

med samme bølgelængde $\lambda = 1.81 \text{ Å}$ har		
Røntgenstråler energien:	8 keV	
Elektroner energien:	50 eV	

Tabel 1.1 Typiske neutrondata

Ved et neutronspretningsforsøg sendes en stråle af monoenergetiske neutroner ind mod måleobjektet, og antallet af neutroner, der spredes ud gennem rumvinklelementet $d\Omega$, detekteres med en neutrontektor (se fig. 1.2). Et passende sted, hvor teori og eksperiment kan mødes, er derfor det differentielle spredningstværsnit, der er defineret som

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{\text{antallet af neutroner spredt i rumvinklen } d\Omega \text{ pr. spredet}}{\text{antallet af indkomne neutroner}} \times \frac{1}{d\Omega}$$

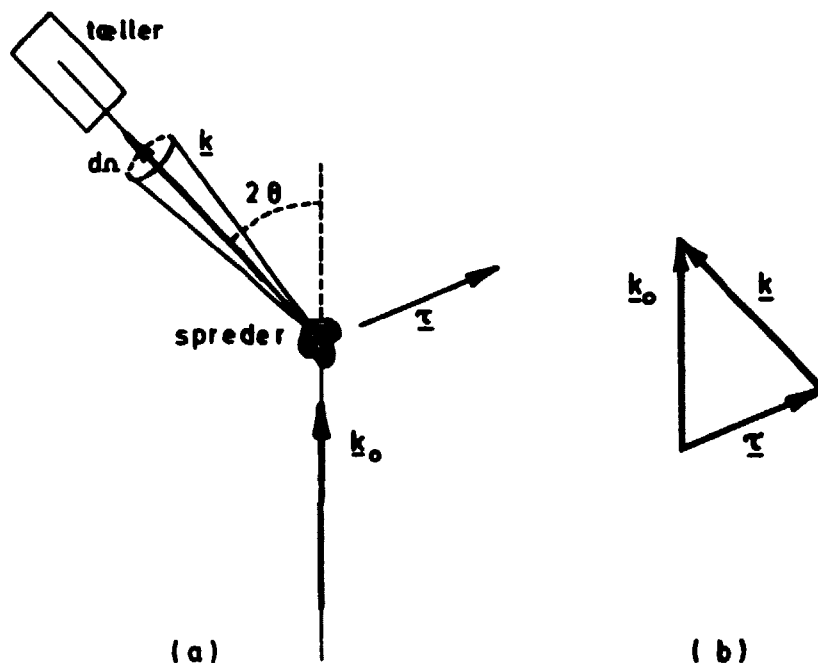


Fig. 1.2 Diagram af Bragg spredning med tilhørende sprednings-trekant.

Vi kan naturligvis integrere denne størrelse over hele rumvinklen (4π). Derved defineres det totale spredningstværsnit som

$$\sigma = \int_{4\pi} \frac{d\sigma}{d\Omega} d\Omega = \frac{\text{antallet af spredte neutroner pr. spreder}}{\text{antallet af indkomne neutroner}}$$

Da neutronerne også kan vekselvirke energetisk med måleobjektet, definerer vi også det partielle differentielle tværsnit

$$\frac{d^2\sigma}{d\Omega dE} = \frac{\left\{ \begin{array}{l} \text{antallet af neutroner spredt i rumvinklen } d\Omega \\ \text{og med energitab mellem } E \text{ og } E+dE \text{ pr. spreder} \end{array} \right\}}{\text{antallet af indkomne neutroner}} \times \frac{1}{d\Omega dE}$$

Der gælder naturligvis at

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \int_{-\infty}^{\infty} dE \frac{d^2\sigma}{d\Omega dE} \quad (1.2)$$

Den indkomne neutronstråle beskrives ved bølgevektoren \underline{k}_0 og den spredte ved bølgevektoren \underline{k} (se fig. 1.2.a). Disse har dimension af L^{-1} , og spredningsfænomenerne beskrives derfor bedst i det reciprokke rum. Sprederen beskrives i dette rum som et sæt af reciprokke

gittervektorer. De reciproke gittervektorer har følgende meget vigtige definition:

En reciprok gittervektor er en vektor, \underline{r} , som står vinkelret på et sæt gitterplaner og hvis længde er givet ved $2\pi/d$, hvor d er afstanden mellem gitterplanerne.

De reflekterende neutroner fra et sæt gitterplaner er elastisk spredte, således at $|\underline{k}_0| = |\underline{k}|$ og spredningsbetingelsen er givet ved den velkendte Bragg-ligning

$$\lambda = 2d \sin\theta \quad (1.3)$$

hvor $2\theta \equiv \angle(\underline{k}, \underline{k}_0)$.

Dette omskrives mere bekvemt til

$$\frac{2\pi}{|\underline{k}_0|} = \frac{4\pi}{|\underline{r}|} \sin\theta \quad (1.4)$$

eller

$$\underline{r} = \underline{\kappa} \equiv \underline{k}_0 - \underline{k} \quad (1.5)$$

hvorved spredningsvektoren $\underline{\kappa}$ er defineret (se fig. 1.2.b). Denne simple betingelse for Bragg-refleksion (at spredningsvektoren er lig en reciprok gittervektor) viser det hensigtsmæssige i indførelsen af det reciproke rum.

Indsættes en krystal i den polyenergetiske neutronstråle fra reaktoren, kan Bragg-betingelsen udnyttes til produktion af monoenergetiske neutroner. En krystal (monokromator) indsættes i den polyenergetiske neutronstråle fra reaktoren. Den reciproke gittervektor (\underline{r}_M) for et udvalgt sæt gitterplaner sammen med spredningsvinklen i monokromatorsystemet definerer den fra monokromatorsystemet udgående neutronstråles bølgetal \underline{k}_0 og dermed neutronstrålens energi (se fig. 1.3).

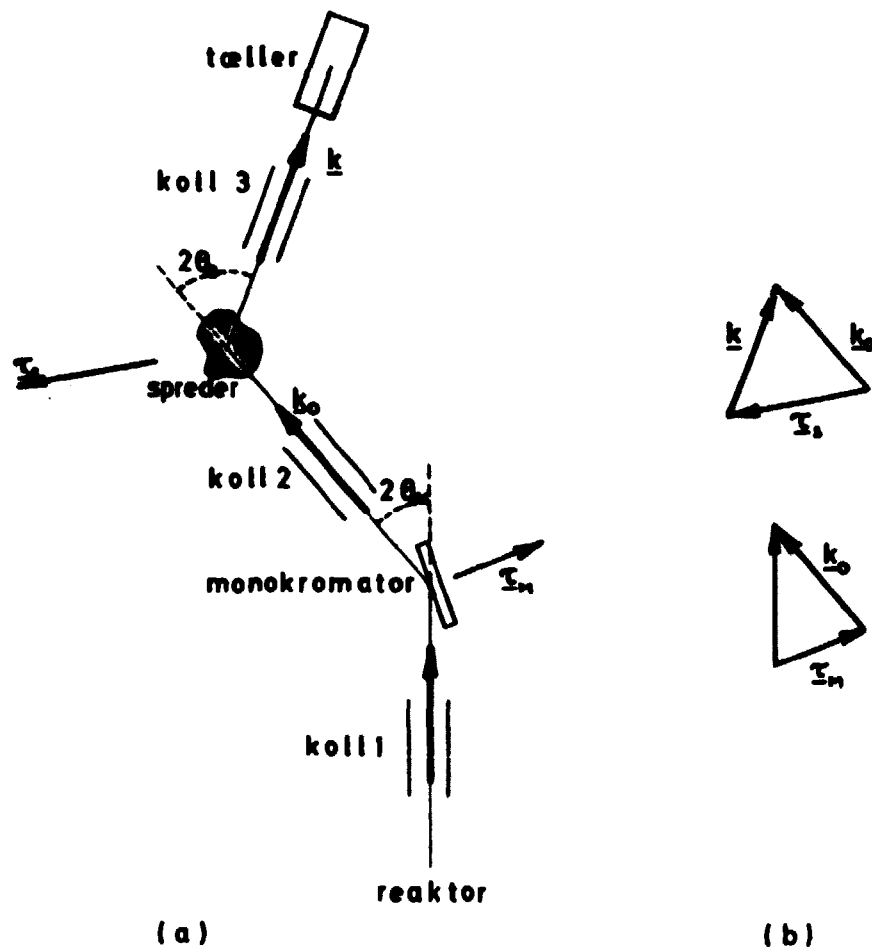


Fig. 1.3 Diagram af spredningen i et toaksespektrometer med tilhørende spredningstrekanter.

Monokromatorsystemets indgående og udgående retninger er defineret ved hjælp af kollimatorer (se afs. 4). Ved denne proces fås også neutroner med bølgevektor $2x\underline{k}_0$, $3x\underline{k}_0$ (højere ordens kontaminering), hvoraf $2x\underline{k}_0$ ofte er den mest generende, idet intensiteten af neutroner fra reaktoren aftager, når bølgevektoren vokser (fig. 1.1). Denne kontaminering fjernes ved enten at indsætte et filter (afs. 4), som spreder disse neutroner ud af neutronstrålen, eller ved at vælge en reciprok gittervektor $\underline{\tau}_M$, således at den refleksion, der er givet ved $2\underline{\tau}_M$ er en forbudt refleksion.

Toaksespektrometeret, som er skitseret på fig. 1.3, er særdeles velegnet til at detektere elastisk spredning $|\underline{k}_0| = |\underline{k}|$. Det man detekterer er naturligvis $\frac{d\sigma}{d\Omega}$ men da tværsnittet for de rent uelastiske processer er flere størrelsesordener mindre end det rent elastiske tværsnit, kan man som regel betragte disse som en baggrund til den elastiske spredning. Toaksespektrometeret benyttes til strukturbestemmelse af både atomare og magnetiske strukturer (se afs. 2).

Treaksespektrometeret er ganske lig toaksespektrometeret, bortset fra at der mellem sprederen og tælleren er indskudt et analysator-system (se fig. 1.4). Analysatorsystemet er lig monokromatorsystemet, således at kun de spredte neutroner, der har et bestemt bølge-

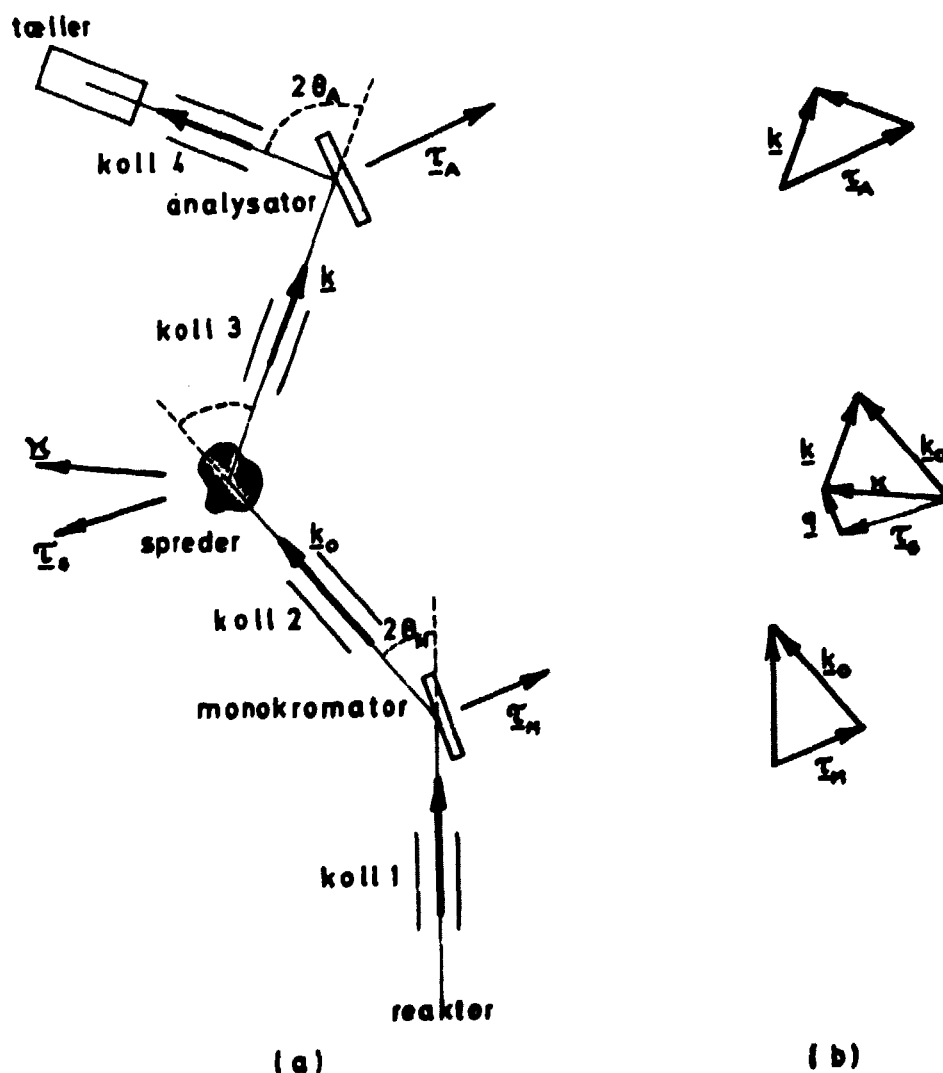


Fig. 1.4 Diagram af spredningen i et treaksespektrometer med tilhørende spredningstrekanter.

tal \underline{k} detekteres. Dette betyder, at man kan bestemme både den energi

$$E = \frac{\hbar}{2m}(|\underline{k}_0|^2 - |\underline{k}|^2) \quad (1.6)$$

og impuls

$$\hbar \underline{q} = \hbar(\underline{k} - \underline{k}_S) \quad (1.7)$$

som neutronen har overført til sprederen (se fig. 1.4). \underline{k}_S er den reciproke gittervektor, der ligger nærmest \underline{k} . Treaksespektrometeret måler derfor sammenhørende værdier af \underline{q} og E . Dette benyttes blandt andet til bestemmelse af dispersionsrelationer for fononer og spinbølger (se afs. 3). Når man skal bestemme sammenhørende værdier af \underline{q} og E for den dynamiske proces i sprederen, vælger man som regel enten at holde \underline{q} konstant og variere E (konstant q -scan) eller det omvendte (konstant E -scan).

2. ELASTISK SPREDNING

2.1 Nukleær spredning

Vi vil i dette afsnit kun betragte elastisk spredning, hvilket vil sige, at neutronen ikke udveksler energi med sprederen, men kun undergår et skift i impuls. Dette betyder, at $|\underline{k}| = |\underline{k}_0|$. Vi vil antage, at både den indkommende og spredte stråling kan beskrives ved plane bølger, således at neutronens begyndelsestilstand er givet ved

$$\psi_{\underline{k}_0} = |\underline{k}_0\rangle = \frac{1}{L^{3/2}} \exp(-i \underline{k}_0 \cdot \underline{r}) \quad (2.1.1)$$

og slutttilstanden

$$\psi_{\underline{k}} = |\underline{k}\rangle = \frac{1}{L^{3/2}} \exp(-i \underline{k} \cdot \underline{r}) \quad (2.1.2)$$

Bølgefunktionerne er normerede således, at sandsynligheden for at finde neutronen indenfor en stor boks med volumen L^3 er 1.

Lad os omskrive tværsnittet til

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = W_{\underline{k}_0 \rightarrow \underline{k}} \frac{mL^3}{\hbar k_0} \quad (2.1.3)$$

idet neutronfluxen i primærstrålen er $\frac{\hbar k_0}{mL^3}$, og $W_{\underline{k}_0 \rightarrow \underline{k}}$ angiver sandsynligheden for, at neutronen spredes fra tilstanden $|\underline{k}_0\rangle$ til tilstanden $|\underline{k}\rangle$. Overgangssandsynligheden er givet ved Fermi's gyldne regel

$$W_{\underline{k}_0 \rightarrow \underline{k}} = \frac{2\pi}{\hbar L^3} |\langle \underline{k} | \hat{V} | \underline{k}_0 \rangle|^2 \rho_{\underline{k}}(E) \quad (2.1.4)$$

hvor \hat{V} er vekselvirkningspotentialiet mellem neutronen og sprederen, og $\rho_{\underline{k}}(E)$ er tilstandstætheden pr. energienhed af de spredte neutroner. Udderledelsen af dette udtryk findes i ethvert standardværk om kvantemekanik.

Det kan vises, at

$$\rho_{\underline{k}}(E) = \left(\frac{L}{2\pi}\right)^3 \frac{mk}{\hbar^2} d\Omega \quad (2.1.5)$$

Indsættes (2.1.4) og (2.1.5) i (2.1.3) får vi som det endelige udtryk for spredningstværsnittet

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{k}{k_0} \left(\frac{m}{2\pi\hbar^2}\right)^2 |\langle \underline{k} | \hat{V} | \underline{k}_0 \rangle|^2 \quad (2.1.6)$$

Er neutronen elastisk spredt er $k = k_0$. For at komme videre må vi kende det spredende system, og det mest simple, vi kan tænke på, er en punktformet isotrop-spreader. Denne beskrives lettest ved potentialiet (Fermi's pseudopotential)

$$\hat{V} = \frac{2\pi\hbar^2}{m} b \delta(\underline{r}-\underline{R}) \quad (2.1.7)$$

hvor b er den såkaldte spredningslængde, og \underline{R} angiver spreders position i rummet. Vi får nu, idet vi placerer sprederen i origo ($\underline{R} = \underline{0}$)

$$\begin{aligned} \langle \underline{k} | \hat{V} | \underline{k}_0 \rangle &= \frac{2\pi\hbar^2}{m} b \int \exp(i\underline{k} \cdot \underline{r}) \delta(\underline{r}) \exp(-i\underline{k}_0 \cdot \underline{r}) d\underline{r} \\ &= \frac{2\pi\hbar^2}{m} b \end{aligned} \quad (2.1.8)$$

og dermed

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = b^2 \quad (2.1.9)$$

Det viser sig, at en god beskrivelse af en krystal er, at denne består af en række spredere med stedvektorer \underline{R}_l . For dette system bliver vekselvirkningspotentialiet

$$\hat{V}(\underline{r}) = \frac{2\pi\hbar^2}{m} \sum_l b_l \delta(\underline{r}-\underline{R}_l) \quad (2.1.10)$$

og dermed

$$\begin{aligned} \langle \underline{k} | \hat{V}(\underline{r}) | \underline{k}_0 \rangle &= \frac{2\pi\hbar^2}{m} \sum_l b_l \int \exp(i\underline{k} \cdot \underline{r}) \delta(\underline{r}-\underline{R}_l) \exp(-i\underline{k}_0 \cdot \underline{r}) d\underline{r} \\ &= \frac{2\pi\hbar^2}{m} \sum_l b_l \exp(i(\underline{k}-\underline{k}_0) \cdot \underline{R}_l), \end{aligned} \quad (2.1.11)$$

og idet vi indfører spredningsvektoren $\underline{\kappa} = \underline{k}_0 - \underline{k}$ fås

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \left| \sum_l b_l \exp(i\underline{\kappa} \cdot \underline{R}_l) \right|^2 \quad (2.1.12)$$

Det hele er nu reduceret til at udvikle summen på højre side af lighedstegnet. Vi vil først gøre dette for en krystal bestående af ens atomer med et atom pr. enhedscelle.

$$\left| \sum_l b_l \exp(i\underline{\kappa} \cdot \underline{R}_l) \right|^2 = b^2 \left| \sum_l \exp(i\underline{\kappa} \cdot \underline{R}_l) \right|^2 \quad (2.1.13)$$

Består krystallen af N atomer, giver summen i (2.1.13)

$$\sum_l \exp(i\underline{\kappa} \cdot \underline{R}_l) = \left| \frac{1 - \exp(iN\underline{\kappa} \cdot \underline{R}_l)}{1 - \exp(i\underline{\kappa} \cdot \underline{R}_l)} \right|^2 = \left| \frac{\sin N \frac{\underline{\kappa} \cdot \underline{R}_l}{2}}{\sin \frac{\underline{\kappa} \cdot \underline{R}_l}{2}} \right|^2 \quad (2.1.14)$$

Denne funktion er skitseret på fig. (2.11) for $N = 10$. Det bemærkes, at summen har værdien N^2 for $\underline{\kappa} \cdot \underline{R}_l = 2\pi n$ (n er et helt tal),

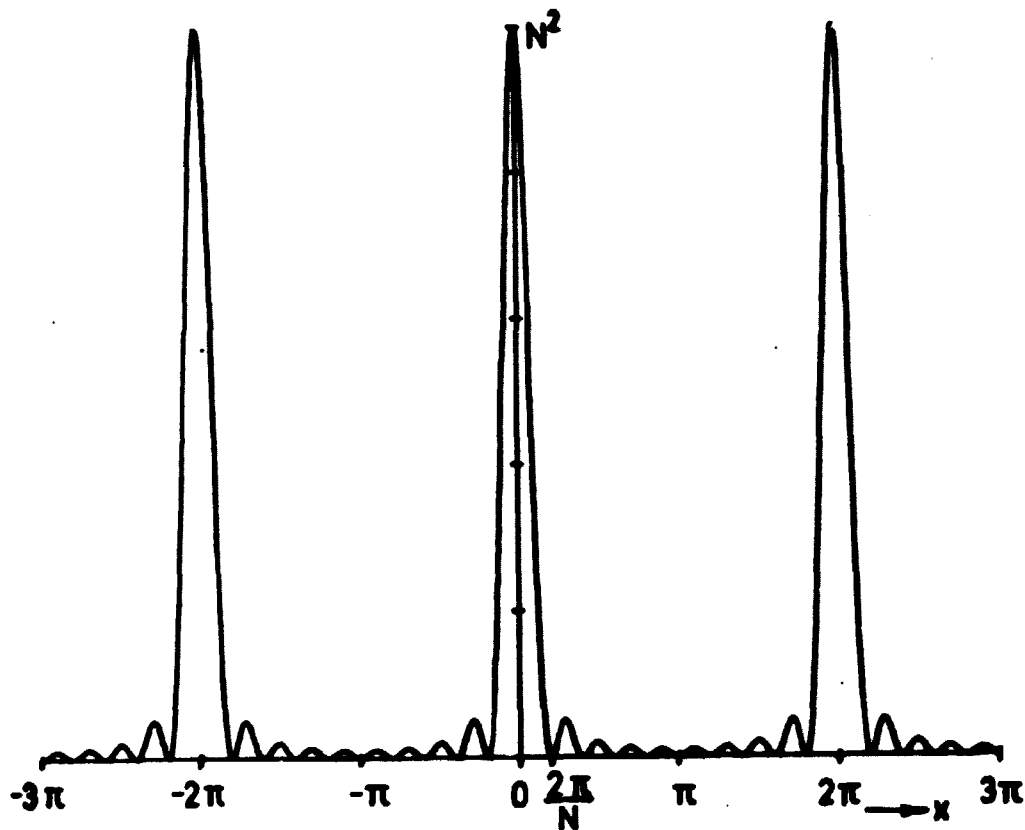


Fig. 2.1.1 Funktionen $\sin^2 \frac{Nx}{2} / \sin^2 \frac{x}{2}$ for $N = 10$.

og at den går imod 0 for $N \rightarrow \infty$, når $\underline{\kappa} \cdot \underline{R}_\ell \neq 2\pi n$. Da en krystal består af et meget stort antal atomer, kan vi som en meget fin tilnærmelse beskrive summen som en række δ -funktioner (se fig. 2.1.1). Vi har dermed nået det meget vigtige resultat, at spredningstværsnittet er 0 undtagen, når

$$\underline{\kappa} \cdot \underline{R}_\ell = 2\pi n \quad (2.1.15)$$

hvilket betyder, at spredningsvektoren netop er lig en reciprok gittervektor $\underline{\tau}$. Spredningstværsnittet kan derfor skrives på formen

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = b^2 \frac{(2\pi)^3}{V_0} \sum_{\underline{\tau}} \delta(\underline{\kappa} - \underline{\tau}) \quad (2.1.16)$$

hvor V_0 er enhedscellens volumen. Konstanten $\frac{(2\pi)^3}{V_0}$ findes lettest ved at integrere ligningen

$$\left| \sum_{\underline{l}} \exp(i\underline{\kappa} \cdot \underline{R}_l) \right|^2 = \text{konst} \sum_{\underline{r}} \delta(\underline{\kappa} - \underline{r}) \quad (2.1.17)$$

over den reciproke celle med hensyn til $\underline{\kappa}$.

Dette overlades som en øvelse til læseren.

Toaksespektrometeret er særdeles velegnet til at undersøge, hvornår Bragg-betingelsen $\underline{\kappa} = \underline{r}$ er opfyldt. Ved at ændre spredningsvektorens længde (defineret ved tallerens position) og retning (defineret ved sprederens rotation) kan vi scanne i en vilkårlig retning i det reciproke rum. Dette er vist på fig. 2.1.1.

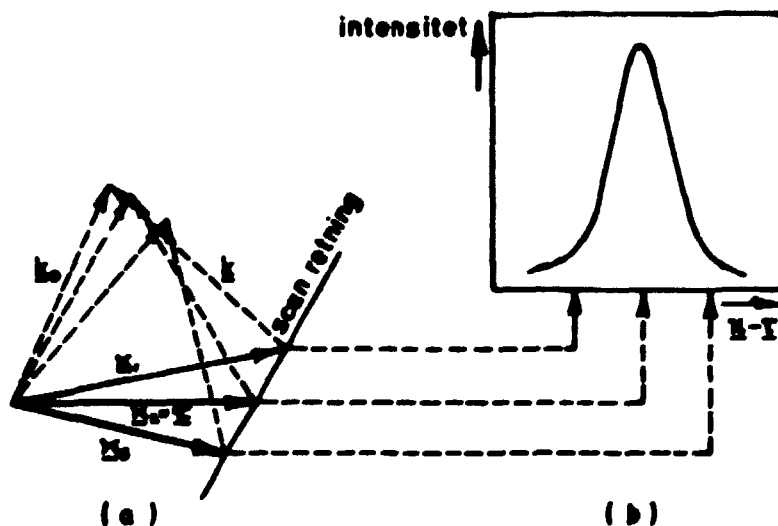


Fig. 2.1.2 (a) Principskitse og (b) den tilhørende intensitetsfordeling for et scan gennem et gitterpunkt i det reciproke rum.

Intensitetsfordelingen er naturligvis ikke nogen ren δ -funktion. Dette skyldes, at reelle krystaller ikke er perfekte enkrystaller, og at der er en endelig vinkeludbredning (kollimering) af indkommende og udgående neutronstråler (se afs. 4). Det viser sig, at intensiteten med god tilnærmelse er af Gaussisk form.

Vi vil dernæst gå over til at behandle det tilfælde, hvor der er flere atomer pr. enhedscelle. Idet \underline{R}_n angiver cellens position og \underline{d}_v atomets placering indenfor cellen, fås

$$\underline{R}_l = \underline{R}_n + \underline{d}_v \quad (2.1.18)$$

og dermed

$$\begin{aligned} \frac{d\sigma}{d\Omega} &= b^2 \left| \sum_l \exp(i\underline{\kappa} \cdot (\underline{R}_n + \underline{d}_v)) \right|^2 \\ &= b^2 \left| \sum_v \exp(i\underline{\kappa} \cdot \underline{d}_v) \sum_n \exp(i\underline{\kappa} \cdot \underline{R}_n) \right|^2 \\ &= b^2 \frac{(2\pi)^3}{V_0} \sum_{\underline{\tau}} |F(\underline{\tau})|^2 \delta(\underline{\kappa} - \underline{\tau}) \end{aligned} \quad (2.1.19)$$

hvor vi har indført strukturfaktoren

$$F(\underline{\tau}) = \sum_v \exp(i\underline{\tau} \cdot \underline{d}_v) \quad (2.1.20)$$

Som et sidste tilfælde vil vi se på en legering. Vi vil antage, at vi har en tilfældig fordeling af to slags atomer med spredningsamplituderne henholdsvis b_1 og b_2 .

$$\begin{aligned} \frac{d\sigma}{d\Omega} &= \left| \sum_l b_l \exp(i\underline{\kappa} \cdot \underline{R}_l) \right|^2 \\ &= \sum_{ll'} b_l b_{l'} \exp(i\underline{\kappa} \cdot (\underline{R}_l - \underline{R}_{l'})) \end{aligned} \quad (2.1.21)$$

Dobbeltsommen udføres ved først at summere over alle par af gitterpunkter, som har $\underline{R}_l - \underline{R}_{l'} = \underline{R}_m$, med \underline{R}_m fastholdt.

Denne enkeltsum giver

$$\exp(i\underline{\kappa} \cdot \underline{R}_m) \sum_l b_l b_{l+m} = N \exp(i\underline{\kappa} \cdot \underline{R}_m) \langle b_0 b_m \rangle \quad (2.1.22)$$

hvor vi har indført middelværdien

$$\langle b_0 b_m \rangle = \frac{1}{N} \sum_l b_l b_{l+m} \quad (2.1.23)$$

Den tilfældige fordeling af spredningsamplituderne b_1 og b_2 giver

$$\langle b_o b_m \rangle = \langle b \rangle \langle b \rangle \text{ for } m \neq o \quad (2.1.24)$$

hvor

$$\langle b \rangle = \frac{N_1}{N} b_1 + \frac{N_2}{N} b_2 \quad (2.1.25)$$

N_1 og N_2 er antallet af spredningsatomer med spredningsamplitude, henholdsvis b_1 og b_2 . Helt alment gælder

$$\langle b_o b_m \rangle = \langle b \rangle^2 + (\langle b^2 \rangle - \langle b \rangle^2) \delta_{om} \quad (2.1.26)$$

Indføres dette i udtrykket for spredningstværsnittet, fås

$$\begin{aligned} \frac{d\sigma}{d\Omega} &= N \langle b \rangle^2 \sum_m \exp(i \underline{\kappa} \cdot \underline{R}_m) + N (\langle b^2 \rangle - \langle b \rangle^2) \\ &= \frac{N \langle b \rangle^2 (2\pi)^3}{V_o} \sum_{\underline{\tau}} |F(\underline{\tau})|^2 \delta(\underline{\kappa} - \underline{\tau}) + N (\langle b^2 \rangle - \langle b \rangle^2) \end{aligned} \quad (2.1.27)$$

Det første led giver som før koherent spredning, medens det andet viser fremkomsten af inkoherent stråling. Den sidstnævnte giver i mange tilfælde blot en uønsket konstant baggrund til en koherente stråling, men kan for mere komplicerede systemer end det her omtalte, give værdifulde oplysninger.

Vi har indtil nu set bort fra atomernes termiske fluktuationer (se afs. 3). Beskriver vi udsvinget fra ligevægtspositionen med u_l , er positionen af det l -te atom

$$\underline{R}_l = \underline{R}_{l0} + \underline{u}_l(t) \quad (2.1.28)$$

Det elastiske tværsnit kan skrives som

$$\begin{aligned} \frac{d\sigma}{d\Omega} &= \left| \sum_l b_l \langle \exp(i \underline{\kappa} \cdot (\underline{R}_{l0} + \underline{u}_l)) \rangle \right|^2 \\ &= \left| \sum_l b_l \exp(i \underline{\kappa} \cdot \underline{R}_{l0}) \langle \exp(i \underline{\kappa} \cdot \underline{u}_l) \rangle \right|^2 \end{aligned} \quad (2.1.29)$$

hvor $\langle \dots \rangle$ betegner den termiske middelværdi.

$$\langle \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{u}_\ell) \rangle = 1 + i\langle \mathbf{k} \cdot \mathbf{u}_\ell \rangle - \frac{1}{2}\langle (\mathbf{k} \cdot \mathbf{u}_\ell)^2 \rangle \quad (2.1.30)$$

I denne rækkeudvikling er $\langle \mathbf{k} \cdot \mathbf{u}_\ell \rangle = 0$, da den tilfældige termiske bevægelse af atomerne er ukorreleret med retningen af \mathbf{k} . Vi bemærker, at $\exp(-\frac{1}{2}\langle (\mathbf{k} \cdot \mathbf{u}_\ell)^2 \rangle)$ for de første to leeds vedkommende har samme rækkeudvikling som $\langle \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{u}_\ell) \rangle$ og dermed

$$\langle \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{u}_\ell) \rangle = \exp(-\frac{1}{2}\langle (\mathbf{k} \cdot \mathbf{u}_\ell)^2 \rangle) = \exp(-W) \quad (2.1.31)$$

hvorved vi har indført Debye-Waller exponenten W . e^{-2W} betegnes Debye-Waller faktoren. Ved indsættelse ses, at det endelige udtryk for det koherente elastiske tværsnit bliver

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{N b^2}{V_0 (2\pi)^3} \sum_{\mathbf{r}} |F(\mathbf{r})|^2 \delta(\mathbf{k} - \mathbf{r}) \exp(-2W(\mathbf{k})) \quad (2.1.32)$$

Det bemærkes, at e^{-2W} bliver mindre for større \mathbf{r} og for højere temperatur. Det sidste gælder, fordi u_ℓ bliver større for højere temperatur.

2.2 Magnetisk spredning

Der er hidtil blevet set bort fra neutronens spin. Hvis sprederen består af et magnetisk materiale, vil neutronen vekselvirke med det felt, der produceres af de uparrede elektroner. Vi kan let finde energien af en neutron med spin-moment σ_n i et magnetfelt \underline{H} .

$$\hat{V} = - \frac{\gamma \hbar_\ell}{m} \sigma_n \cdot \underline{H} \quad (2.2.1)$$

hvor $\gamma = 1.91 \mu_B$ og e er elektronens ladning.

Består sprederen af atomer med en uparret elektron pr. atom, bliver magnetfeltet fra hvert atom

$$\underline{H} = \underline{v} \times \frac{\underline{\mu}_S \times (\underline{r} - \underline{r}_\ell)}{|\underline{r} - \underline{r}_\ell|^3} + \frac{(-e)}{m_\ell c} \frac{\underline{p} \times (\underline{r} - \underline{r}_\ell)}{|\underline{r} - \underline{r}_\ell|^3} \quad (2.2.2)$$

idet den uparrede elektron kan beskrives som en ladet partikel med spin-moment $\underline{\mu}_s$ og hastigheden \underline{p}/m_e . Vi bemærker her, at positionen af den uparrede elektron indgår (\underline{r}_l), og vi må derfor forvente, at udstrækningen af bølgefunktionen for den uparrede elektron må indgå i spredningstværsnittet. Endvidere er \underline{H} ikke isotrop, så neutronen spredes ikke isotropt fra hvert spredningscenter. Beregnes $\langle \underline{k} | \hat{V} | \underline{k}_0 \rangle$, idet der summeres over alle atomer, fås et udtryk, der formelt ligner spredningstværsnittet for den nukleære spredning, idet

$$\frac{d\sigma}{d\Omega}_{\text{mag}} = \left| \sum_l \underline{E}_l \exp(i\underline{k} \cdot \underline{R}_l) \right|^2 \quad (2.2.3)$$

men spredningsamplituden beskrives ved en vektoriel størrelse, som er givet ved

$$\underline{E}_l = p f(\underline{\kappa}) \hat{\underline{\kappa}} \times \underline{\mu}_l \times \hat{\underline{\kappa}} \quad (\hat{\underline{\kappa}} = \frac{\underline{\kappa}}{|\underline{\kappa}|}) \quad (2.2.4)$$

Vi bemærker, at det kun er den komponent af det totale moment, som står vinkelret på $\underline{\kappa}$, der giver et bidrag (anisotrop spredning). Udstrækningen af moment-tætheden indgår, idet den magnetiske formfaktor $f(\underline{\kappa})$ er den Fourier-transformerede af denne. p er blot en konstant:

$$p = \frac{\gamma^2 e}{2m_e c^2} \quad (2.2.5)$$

hvor m_e er elektronens masse. Det skal her anføres, at det magnetiske og nukleære spredningstværsnit adderer simpelt sammen for upolariserede neutroner. D.v.s. at det totale differentielle spredningstværsnit er givet ved

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{d\sigma}{d\Omega}_{\text{nuc}} + \frac{d\sigma}{d\Omega}_{\text{mag}} \quad (2.2.6)$$

$$= \left| \sum_l b_l \exp(i\underline{k} \cdot \underline{R}_l) \right|^2 + \left| \sum_l \underline{E}_l \exp(i\underline{k} \cdot \underline{R}_l) \right|^2$$

Det er ikke hermed givet, at den magnetiske og nukleære spredning optræder samme sted i det reciproke rum. Kun for simple ferromagnetiske materialer falder nukleær og magnetisk spredning sammen. For mere komplicerede systemer vil den magnetiske spredning vise sig andre steder i det reciproke rum.

3 UELASTISK SPREDNING

Vi skal nu se på uelastisk spredning, dvs. spredning af neutroner, der udveksler energi med sprederen. Men først betragter vi de kvantiserede svingninger (fononer) i sprederen. Disse kan kretes eller annihileres ved henholdsvis nedbremsning eller acceleration af neutronen.

3.1 Fononer

Som spreder betragter vi et simplificeret system, nemlig et langt en-dimensionalt krystalgitter, dvs. en række ens atomer, der er "koblede" med en "fjeder"-kraft mellem (og kun mellem) nærmeste naboer.

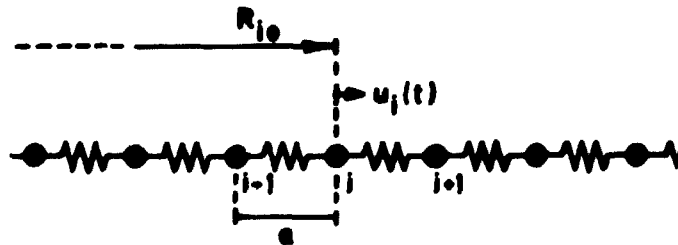


Fig. 3.1.1 En-dimensionalt et atomigt krystalgitter.

Vi betragter først den situation, hvori atomerne svinger i kædens længderetning. Det i -te atoms position kan beskrives ved

$$\underline{R}_i(t) = \underline{R}_{i0} + \underline{u}_i(t) \quad (3.1.1)$$

hvor \underline{R}_{i0} er atomets ligevægtsposition og $\underline{u}_i(t)$ er dets tidsafhængige afstand fra ligevægtspositionen.

Vi tillægger gitteret periodiske randbetingelser, dvs. at rækken af atomer fortsætter i sig selv. (Born-von-Karmans randbetingelser). Hamilton funktionen for systemet af atomer er:

$$\mathcal{H} = \sum_i \frac{p_i^2}{2m} + \sum_i \left\{ V(R_i(t) - R_{i+1}(t)) + V(R_i(t) - R_{i-1}(t)) \right\} \quad (3.1.2)$$

m er atommassen, p_i er impulsen for det i-te atom, og V er det potential, det i-te atom "ser" som følge af tilstedeværelsen af naboatomet. Dette potential er altså bestemt af "fjedere".

Vi udvikler V om ligevægtspositionen, hvor første afledede er nul, og vi får:

$$V(R_i(t) - R_{i+1}(t)) = V_0(R_i(0) - R_{i+1}(0)) + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 V}{\partial R_i^2} u_i^2 + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 V}{\partial R_{i+1}^2} u_{i+1}^2 + \frac{\partial^2 V}{\partial R_i \partial R_{i+1}} u_i u_{i+1} + \dots \quad (3.1.3)$$

Vi kaster højere ordens led bort og får:

$$\mathcal{H} = \sum_i \frac{p_i^2}{2m} + \text{konst. led} + \sum_i \left\{ \frac{\partial^2 V}{\partial R_i^2} u_i^2 + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 V}{\partial R_{i+1}^2} u_{i+1}^2 + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 V}{\partial R_{i-1}^2} u_{i-1}^2 + \frac{\partial^2 V}{\partial R_i \partial R_{i+1}} u_i u_{i+1} + \frac{\partial^2 V}{\partial R_i \partial R_{i-1}} u_i u_{i-1} \right\} \quad (3.1.4)$$

Bevægelsesligningen for det i-te atom er:

$$m \frac{\partial^2 u_i(t)}{\partial t^2} = - \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial u_i} = 2 \frac{\partial^2 V}{\partial R_i^2} u_i + \frac{\partial^2 V}{\partial R_i \partial R_{i+1}} u_{i+1} + \frac{\partial^2 V}{\partial R_i \partial R_{i-1}} u_{i-1} \quad (3.1.5)$$

En løsning kan skrives på formen

$$u_i(t) = \exp(i\omega t) u_i(0) \quad (3.1.6)$$

Da endvidere det (i+1)-te (og (i-1)-te) atom har samme fysiske omgivelser som det i-te atom, kan u_{i+1} og u_{i-1} kun adskille sig fra u_i ved en fase faktor:

$$u_{i+1}(t) = u_i(t) \cdot \exp(iqa) \quad (3.1.7)$$

$$u_{i-1}(t) = u_i(t) \cdot \exp(-iqa)$$

Denne løsning indsættes i (3.1.5):

$$-m\omega^2 = 2 \frac{\partial^2 V}{\partial R_i^2} + \frac{\partial^2 V}{\partial R_i \partial R_{i+1}} \exp(iqa) + \frac{\partial^2 V}{\partial R_i \partial R_{i-1}} \exp(-iqa) \quad (3.1.8)$$

Da der ingen forskel er på de enkelte par af naboatomer, har vi:

$$A = \frac{\partial^2 V}{\partial R_i \partial R_{i+1}} = \frac{\partial^2 V}{\partial R_i \partial R_{i-1}} \quad (3.1.9)$$

For $q = 0$ har vi ingen svingning dvs. $\omega = 0$ og

$$\frac{\partial^2 V}{\partial R_i^2} = A = \text{"fjederkonstanten"} \quad (3.1.10)$$

der indsat i (3.1.8) giver:

$$m\omega^2 = 2A + 2A\cos(qa) \quad (3.1.11)$$

Dette er dispersionsrelationen, der også kan skrives:

$$m\omega^2 = 4A\sin^2\left(\frac{qa}{2}\right) \quad (3.1.12)$$

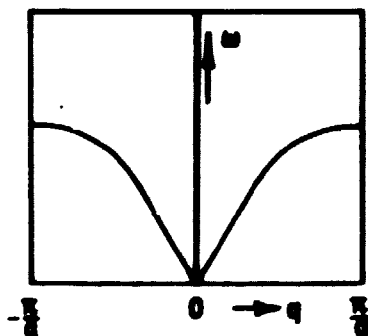


Fig. 3.1.2 Dispersionsrelation for et en-dimensionalt krystalgitter.

For små q har vi

$$m\omega^2 = 4A\left(\frac{qa}{2}\right)^2 \quad (3.1.13)$$

$$\omega = \left(\frac{Aa^2}{m}\right)^{\frac{1}{2}} q = \left(\frac{c}{\rho}\right)^{\frac{1}{2}} q \quad (3.1.14)$$

c er systemets elastiske konstant ρ er massefylden, og $\left(\frac{c}{\rho}\right)^{\frac{1}{2}}$ er lydhastigheden.

Hidtil har vi betragtet longitudinale svingninger, men hvis svingningerne er transversale, får vi stort set det samme, idet Hamilton funktionen bare afhænger anderledes af forskydningerne. Vekselvirkningen er svagere, da atomerne ikke bringes så tæt sammen, og frekvenserne bliver derfor mindre.

Hvis et krystalgitter ikke har symmetriretninger, kan det være svært at definere rene longitudinale eller transversale svingninger, og vi beskriver svingningerne ved en polariseringsvektor: $\underline{\epsilon}(\underline{q})$, således at $\underline{\epsilon} \parallel \underline{q}$ svarer til longitudinale og $\underline{\epsilon} \perp \underline{q}$ svarer til transversale fononer.

De hidtil omtalte fononer kaldes akustiske, da de for små q er rene lydsvingninger. Hvis nu vores kæder indeholdt to slags atomer, er der to mulige måder for disse at svinge i, nemlig den ovenfor omtalte "i fase" (akustiske) svingninger eller "i modfase" kaldet optiske svingninger

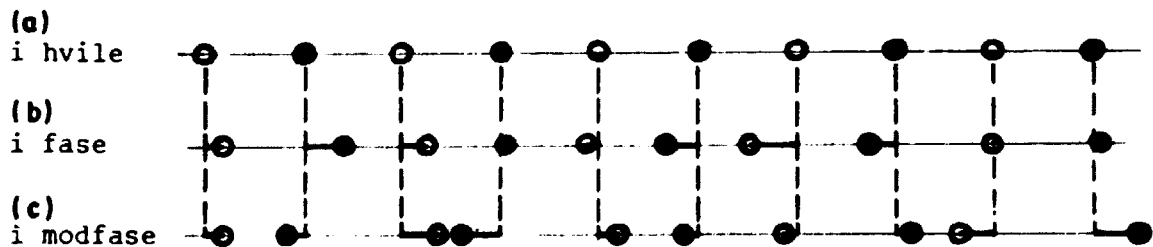


Fig. 3.1.3 Skematisk beskrivelse af et en-dimensionalt 2-atomigt gitter, (a) i hvile, (b) akustisk longitudinal svingning og (c) optisk longitudinal svingning.

i modfase kommer atomerne tæt på hinanden, og vekselvirkningen resulterer i høje frekvenser selv for $q = 0$. Frekvenserne ligger normalt i det infrarøde område af det elektromagnetiske spektrum. Da svingningerne vekselvirker med infrarødt lys, kaldes de optiske svingninger.

Vi har kun set på det endimensionale tilfælde, men i tre dimensioner er beskrivelsen ganske analog, omend mere kompliceret. I det generelle tre-dimensionale system har vi kobling ud til N -te nabo, og vi skriver dispersionsrelationen:

$$m\omega^2 = \sum_{j=-N}^{j=N} A_j \sin\left(\frac{qja}{2}\right) \quad (3.1.15)$$

En bedre beskrivelse opnås ved at indføre et sæt generaliserede koordinater (Q_q) og impulser (P_q) ved kontakt transformationen:

$$u_i = \frac{1}{\sqrt{Nm}} \sum_{q=1}^N Q_q \exp(-iqR_{i0}) \quad (3.1.16)$$

$$P_i = \sqrt{\frac{m}{N}} \sum_{q=1}^N P_q \exp(iqR_{i0}) \quad (3.1.17)$$

da p og u er reelle, må $P_q^* = P_{-q}$ og $Q_q^* = Q_q$, og ved hjælp af dispersionsrelationen kan vi skrive

$$\mathcal{H} = \sum_{q=1}^N \left(\frac{P_q^* P_q}{2} + \omega_q^2 \frac{Q_q^* Q_q}{2} \right) \quad (3.1.18)$$

Det bemærkes, at leddene ikke indeholder krydsled i q , vi har altså et system af N uafhængige svingninger. Ved en kvantemekanisk betragtning ses endvidere, at hvert led netop er Hamilton operatoren for en lineær harmonisk oscillator med frekvensen ω_q og energien

$$E_q = \hbar \omega_q (n_q + \frac{1}{2}) \quad (3.1.19)$$

n_q : helt tal

Vi kalder de N uafhængige svingninger kædens egensvingninger, og energikvanterne for fononer. n_q kaldes besætningstallet og angiver hvor mange fononer, der eksisterer i den q -te egensvingning. I almindelighed har vi for hvert q j -egensvingninger ($\omega_j(q)$), nemlig:

$$\begin{array}{ll} j = 3 & \text{akustiske svingninger} \\ + 3(N-1) & \text{optiske svingninger} \end{array}$$

hvor N er antallet af atomer pr. enhedscelle.

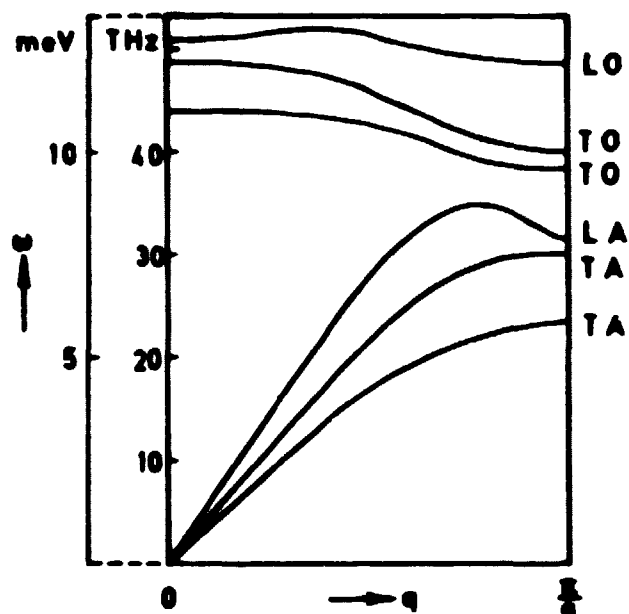
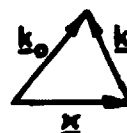


Fig. 3.1.4 Dispersionsrelationer for et tredimensionalt krystalgitter med 2 atomer pr. enhedscelle. A = akustisk, L = longitudinal. O = optisk og T = transversal.

Vekselvirkning mellem neutroner og fononer

Vi skal nu se på tværsnittet for den proces, hvori neutronen udveksler både moment og energi med krystalgitteret:

$$\hbar \underline{k} = \hbar (\underline{k}_0 - \underline{k})$$



$$(3.1.20)$$

$$\hbar \omega = \frac{\hbar^2}{2m} (|\underline{k}_0|^2 - |\underline{k}|^2)$$

$$(3.1.21)$$

Analogt med det elastiske tilfælde er det partielle differentielle tværsnit

$$\frac{\partial^2 \sigma}{\partial \Omega \partial E} = \frac{W_{\underline{k}_0 + \underline{k} | b \rangle \rightarrow | s \rangle}}{d\Omega dE V_0 \cdot \text{konst}}$$

$$(3.1.22)$$

hvor $|b\rangle$ og $|s\rangle$ er henholdsvis begyndelses- og sluttilstand for det spredende system. Overgangssandsynligheden er nu også energi-afhængig, og vores partielle differentielle tværsnit skrives:

$$\frac{\partial^2 \sigma}{\partial \Omega \partial E} = \frac{k}{k_0} \left(\frac{m}{2\pi\hbar} \right)^2 |\langle k | \langle S | \hat{V} | b \rangle | k_0 \rangle|^2 \delta(\hbar\omega + E_b - E_s) \quad (3.1.23)$$

For vekselvirkningspotentialiet \hat{V} bruger vi ligesom i det elastiske tilfælde Fermi's pseudopotential. Ved at indsætte potentialiet og gennemføre regninger stort set analogt til det elastiske tilfælde, finder vi, at det differentielle tværsnit kan skrives:

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 \sigma}{\partial \Omega \partial E} = & \langle b^2 \rangle \frac{k}{k_0} \frac{(2\pi)^3}{V_0} \frac{1}{2m} \sum_{\tau} \exp(-2W) \\ & \cdot \sum_{j,q} \frac{|\underline{\kappa} \cdot \underline{\sigma}_j(q)|^2}{\omega_j(q)} [n_j(q) \delta(\omega + \omega_j(q)) \delta(\underline{\kappa} + \underline{q} - \underline{\tau}) \\ & + (n_j(q) + 1) \delta(\omega - \omega_j(q)) \delta(\underline{\kappa} - \underline{q} - \underline{\tau})] \end{aligned} \quad (3.1.24)$$

$\underline{\sigma}_j(q)$ er polariseringen i j -te egensvingning med bølgetallet q , og egenfrekvens $\omega_j(q)$, $n_j(q)$ er besætnings-tallet. Første led indeholdende $\delta(\omega + \omega_j(q)) \delta(\underline{\kappa} + \underline{q} - \underline{\tau})$ repræsenterer en spredningsproces, i hvilken en fonon er annihileret, og andet led en spredningsproces, i hvilken en fonon er kreeret.

3.2 Magnoner

I magnetiske materialer tilskriver vi de enkelte atomers plads det magnetiske moment (spin), der hidrører fra de uparrede elektroner. Spinnenes vekselvirkning med hinanden beskriver vi som:

$$U_{ij} = J \underline{S}_i \cdot \underline{S}_j \quad (3.2.1)$$

J er en koblingsparameter, og \underline{S}_i er spinnet på det i -te atoms plads. I afsnit 3.1 så vi, hvordan atomernes svingninger om deres ligevægtspositioner kunne beskrives som fononer. Tilsvarende kan spinnenes svingninger om deres ligevægtskonfiguration beskrives som magnoner (spinbølger). Disse svingninger om ligevægtspositionerne kan illustreres med fig. (3.2.1) (Kittel):



Fig. 3.2.1 En magnon på en række spin, (a) set i perspektiv, (b) set ovenfra; den viste længde er en bølgelængde (Kittel)

De partielle differentielle tværsnit for kreering eller annihilation af en magnon ser sådan ud:

$$\frac{\partial^2 \sigma}{\partial \Omega \partial E}^{(\pm)} = \left(\frac{\gamma e^2}{m_e c^2} \right)^2 \left\{ \frac{1}{2} g F(\underline{\kappa}) \right\}^2 \frac{k}{k_0} (1 + \hat{\kappa}_z^2) \exp(-2W(\underline{\kappa}))^{\frac{1}{2}} S \frac{2\pi^3}{V_0} \quad (3.2.2)$$

$$\sum_{\underline{q}, \tau} \left\{ (n_{\underline{q}} + \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2}) \delta(\hbar \omega_{\underline{q}} \mp \hbar \omega) \delta(\underline{\kappa} \mp \underline{q} - \tau) \right\}$$

Øverste tegn gælder for kreation af magnon, nederste for annihilation.

$\gamma = -1.91 \mu_B$ gyromagnetisk forhold for neutronen.

m_e = elektronens masse.

g = Landé opsplittingsfaktor.

$F(\underline{\kappa})$ = den magnetiske formfaktor = $\int d\underline{r} \exp(i\underline{\kappa} \cdot \underline{r}) s(\underline{r})$ hvor $s(\underline{r})$ er spintætheden.

$\hat{\kappa}_z$ = orienteringen af magnetiseringen.

c = lyshastigheden.

Hvis ikke der er stor forskel på de partielle differentielle tværsnit eller i energierne for magnoner og fononer, kan det være svært at skelne dem fra hinanden ved en uelastisk neutronspreddning. Vi kan da udnytte, at magnontværsnittet afhænger af et ydre magnetisk felt og ved en variation af feltet bestemme eventuel feltafhængighed og dermed magnetisk spredning.

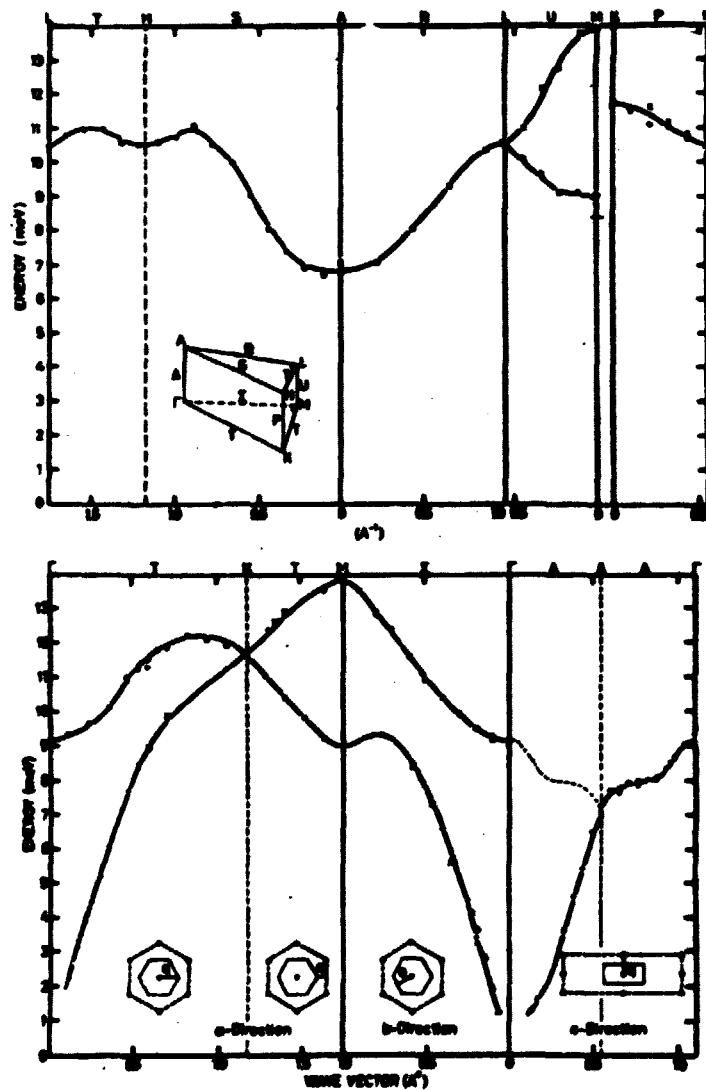


Fig. 3.2.2 Magnon dispersionsrelationer for den sjældne jordart
Terbium (Tb). (J.G. Houmann, Risø).

4. DET EKSPERIMENTELLE UDSTYR

Efter de første afsnits gennemgang af det basale teoretiske grundlag vil den resterende del af dette skrift give en introduktion til det eksperimentelle udstyr. Indledningsvis beskrives hvorledes man udvælger en monokromatisk neutronstråle, og dernæst hvorledes spektrometre til henholdsvis elastisk og uelastisk neutronspreddning er opbygget. Der vil gennem teksten blive lagt vægt på at fremdrage nogle af de begrænsninger og problemer, man støder på ved det eksperimentelle udstyr. Disse betragtninger medfører enkelte regninger, men er i så stort omfang som muligt gjort kvalitative.

4.1 Monokromatorsystemet

En fastlæggelse af neutronstrålens energi og impuls er en fastlæggelse af neutronernes bølgevektor \underline{k}_0 (både retning og længde). I det følgende ses bort fra, at \underline{k}_0 kan have en (lille) vertical komponent.

\underline{k}_0 's retning bestemmes ved at lade neutronstrålen passere gennem en Soller-kollimator, med rektangulært tværsnit, hvori der er indsat neutronabsorberende plader, se fig. 4.1.1.

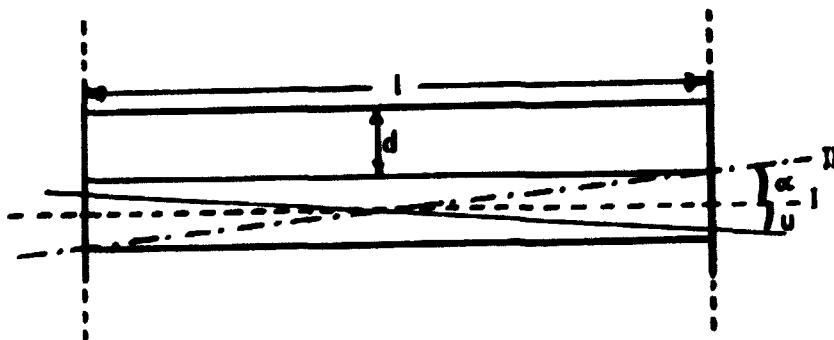


Fig. 4.1.1 Kollimator set fra oven, I: central stråle og II ekstremstråle.

Ved geometriske betragtninger ses, at neutrontransmissionen gennem en ideel kollimator er givet ved en trekantfunktion

$$I(u) = I_0(1 - |\frac{u}{\alpha}|) \quad \alpha = \frac{d}{\lambda} \quad (|\frac{u}{\alpha}| \leq 1) \quad (4.1.1)$$

Reelle kollimatorers transmissionsfunktion beskrives bedre ved en Gaussisk funktion

$$I(u) = I_0 \exp(-(\frac{u}{\alpha'})^2) \quad \alpha' = \frac{\alpha}{2(\ln 2)^{1/2}} \quad (4.1.2)$$

Den eneste mulighed for at fastlægge \underline{k} 's retning absolut er at lade $\alpha \rightarrow 0$. Dette "koster" imidlertid intensitet. Det viser sig, at α' er på 20'-40' er et passende kompromis mellem "intensitetshensyn" og hensyn til, hvor eksakt \underline{k} ønskes fastlagt.

\underline{k} 's længde fastlægges ved en nukleær Bragg-refleksion i monokromatorkrystallen. Bragg-loven giver

$$|\underline{k}| = \frac{|\underline{I}_m|}{2 \sin \theta_m} \quad (4.1.3)$$

Krystaller er ikke perfekte, men opbygget af små perfekte krystallitter, der er lidt misorienterede i forhold til hinanden. Man siger, at krystallen har en mosaikstruktur. Denne struktur kan beskrives ved en sandsynlighedsfordeling, der giver sandsynligheden for at finde en krystallit, der er orienteret vinklen m fra middellokeringen. Er fordelingen en Gauss-funktion

$$W(m) = \text{konstant} \cdot \exp(-(\frac{m}{\eta})^2) \quad \eta' = \frac{\eta}{2(\ln 2)^{1/2}} \quad (4.1.4)$$

taler man om en ideel imperfekt krystal. η kaldes krystallens mosaikspredning. Som monokromatorkrystal benyttes en mosaikkrystal med en ud fra intensitetshensyn passende valgt mosaikspredning (typisk 20'-40').

Det samlede monokromatorsystem ser herefter ud som vist i fig. 4.1.2. Bemærk at der er kollimatorer både før og efter monokromatorkrystallen.

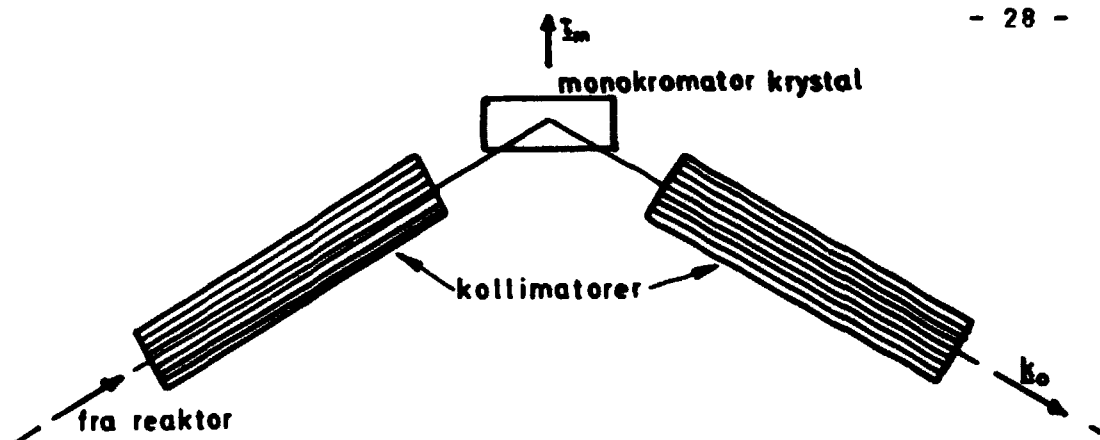


Fig. 4.1.2 Monokromator system.

4.2 Fordelingen af de udvalgte k_o

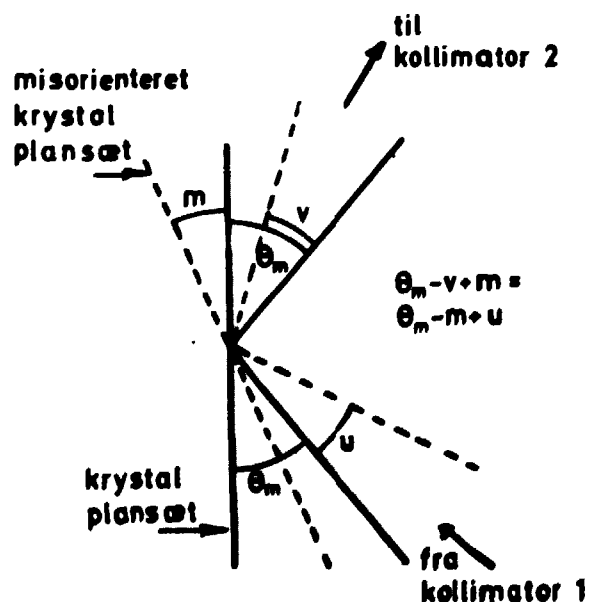
Da transmission gennem kollimatorerne og krystallen er uafhængige hændelser, kan sandsynligheden for at en neutron slipper igennem monokromatorsystemet direkte opskrives som

$$P = \text{konstant} \cdot \exp\left(-\left(\frac{u}{a_1}\right)^2\right) \cdot \exp\left(-\left(\frac{m}{\eta}\right)^2\right) \cdot \exp\left(-\left(\frac{v}{a_2}\right)^2\right) \quad (4.2.1)$$

sandsynlighed for
transmission gennem

↑ ↑ ↑
Kollimator 1 Krystal Kollimator 2

Ved at betragte fig. 4.2.1 ses, at P ikke er en funktion af 3 variable, men kun af 2 thi $v = 2m - u$



Dvs.

$$\begin{aligned}
 P &= P(u, m) = \text{konstant} \cdot \exp\left(-\left(\frac{u}{a_1}\right)^2\right) \exp\left(-\left(\frac{m}{\eta}\right)^2\right) \exp\left(-\left(\frac{2m-u}{a_2}\right)^2\right) \\
 &= \text{konstant} \cdot \exp\left\{-\left[\left(\frac{u}{a_1}\right)^2 + \left(\frac{m}{\eta}\right)^2 + \left(\frac{2m-u}{a_2}\right)^2\right]\right\}
 \end{aligned} \tag{4.2.2}$$

Argumentet til eksponentialfunktionen er en kvadratisk form i u og m . P 's niveaukurver i u, m -planen vil derfor være ellipser. Til at beskrive P -funktionen kan benyttes den niveaukurve for hvilken $P = \frac{1}{2}P_{\text{max}}$.

Det er imidlertid ikke praktisk at beskrive P som funktion af u og m . Det er mere bekvemt at anvende en beskrivelse, hvor P direkte giver information om sandsynligheden for at finde et givet k_0 . Der må derfor foretages en transformation fra vinkelrum til reciprok rum. Denne transformation skal ikke i detaljer gennemgås her, men en af de metoder, man kan benytte, skal antydes. Grundlaget for beregningerne er Bragg-loven. Da vinklerne u og m er små, kan vi arbejde i en lineær tilnærmelse og en ellipse i vinkelrum vil også være en ellipse i reciprok rum. Ved en let omformning kan P gives som

$$P = P_1 \cdot P_2 \tag{4.2.3}$$

med

$$P_1 = \text{konstant} \cdot \exp\left\{-\left(u - 2m \cdot \frac{a_1}{a_1^2 + a_2^2}\right)^2 \cdot \frac{a_1^2 + a_2^2}{a_1^2 \cdot a_2^2}\right\} \tag{4.2.4a}$$

$$P_2 = \text{konstant} \cdot \exp\left\{-m^2 \left(\frac{4}{a_1^2 + a_2^2} + \frac{1}{\eta^2}\right)\right\} \tag{4.2.4b}$$

(mærkerne på a 'erne og η er udeladt).

Lad os betragte tilfældet $P_2 = \text{konstant}$. Dette svarer til, at der kun findes krystallitter med én orientering eller med andre ord monokromatorkrystallen er en perfekt enkrystal. Fig. 4.2.2 antyder, hvorledes de mulige k_0 vil ligge.

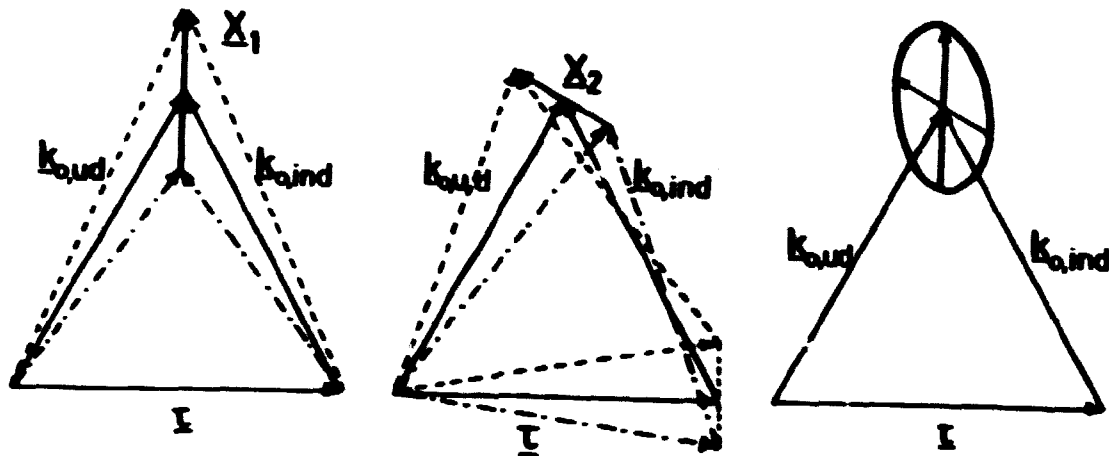


Fig. 4.2.2 Definition af opløsningsvektorerne \underline{X}_1 og \underline{X}_2 som udspænder monokromator systemets opløsningsellipse.

Det ses, at endepunkterne vil falde på en linie. Vi beskriver dette ved en vektor \underline{X}_1 med retning efter den linie, endepunkterne falder på, og længden er bestemt ved P_1 's fulde halvværdibredde.

Vi kan herefter betragte tilfældet $P_1 = \text{konstant}$. Dette er lidt vanskeligere, da både κ og u skal varieres for at opfylde dette krav. Men i lineær tilnærmelse vil de derved fremkomne mulige \underline{k}_0 have endepunkter på en linie, og som før beskriver vi dette ved en vektor \underline{X}_2 med retning efter linien og længde givet ved P_2 's fulde halvværdibredde.

Det kan vises, at \underline{X}_1 og \underline{X}_2 er konjugerede diametre i den til reciprokt rum transformerede ellipse, der er P 's halvværdiniveaue-kurve.

4.3 Højere ordens kontaminering

Ved en Bragg-refleksion er det ikke blot neutroner med bølgevektor \underline{k} , der reflekteres fra gitterplaner med gittervektor \underline{l} , men også neutroner med $2\underline{k}$ vil reflekteres, nemlig fra planer med $2\underline{l}$ og så videre; disse normalt uønskede neutroner kaldes 2' ordens, 3' ordens o.s.v. Se fig. 4.3.1.

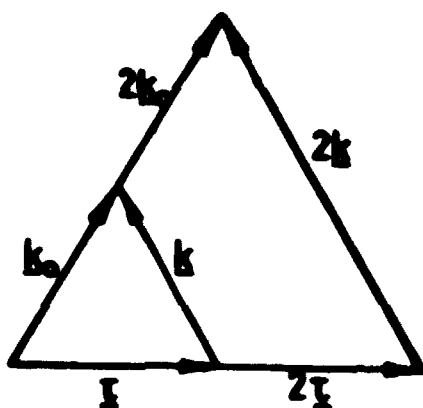


Fig. 4.3.1 Spredningstrekant med anden ordens sprednings indtegnet.

I visse tilfælde er det muligt at filtrere disse neutroner væk fra neutronstrålen.

Som eksempel kan nævnes, at Ge "automatisk" filtrerer 2' ordens neutroner væk, når (111)-refleksionen benyttes, da (222) er en forbudt refleksion (strukturfaktoren er nul). Ved korte bølglængder benyttes Ge i vid udstrækning som monokromatorkrystal.

4.4 Toaksespektrometret

Efter denne håndfaste gennemgang af monokromatorsystemet er det væsentligste forarbejde gjort til at forstå toaksespektrometrets opbygning.

Fra reaktorens Maxwell-fordelte neutronstråle udvælges med monokromatorsystemet en til forsøget passende neutronenergi. Omkring monokromatoren er der en afskærmning af beton og borholdig polyester dels af biologiske hensyn og dels for at holde baggrunden for neutrontælleren lav. Lige udenfor denne afskærmning er der anbragt en monitor, dvs. en tæller, der har en følsomhed på ca. 10^{-4} . Monitoren benyttes til at "tælle" de indkomne neutroner. Som monokromatorkrystal benyttes som regel en Ge-krystal eller en krummet grafit-krystal, der virker som hulspejl og fokuserer en høj neutronstråle på en lille spreder.

Sprederen anbringes på et goniometer i det monokromatiske beam. Goniometret kan roteres om en lodret akse. En velafskærmet tæller detekterer de spredte neutroner. Denne tæller er sort for neu-

troner, således at alle neutroner, der kommer ind i tælleren, vil blive detekteret. Den vil afhængig af spektrometret enten være en lang (30 cm) proportionaltæller fyldt med BF_3 -gas, hvor neutronerne skydes ind gennem i endevindue eller den vil være en proportionaltæller fyldt med ^3He -gas ved et højt tryk (2 eller 4 atm); ^3He -tællerne har et vindue på ca 10 cm'højde, mens de kun er få cm dybe. En skitse af toaksemeteret ses på fig. 4.4.1.

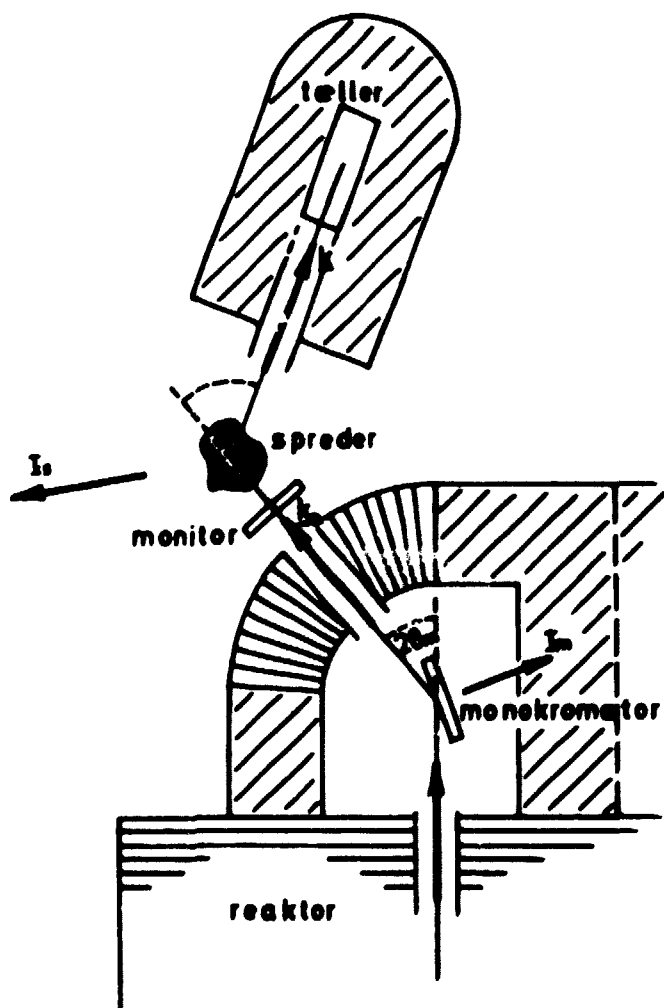


Fig. 4.4.1 Toaksespektrometer.

4.5 Treaksespektrometret

Treaksespektrometret er vist på fig. 4.5.1, og som det ses, er den eneste forskel fra toaksespektrometret, at der mellem sprederen og tælleren er indsat et analysatorsystem. Dette er opbygget ganske som monokromatorsystemet og kan derfor undersøge bølgevektoren for de spredte neutroner. Analysatorokrystallen er som regel en plan grafitkrystal.

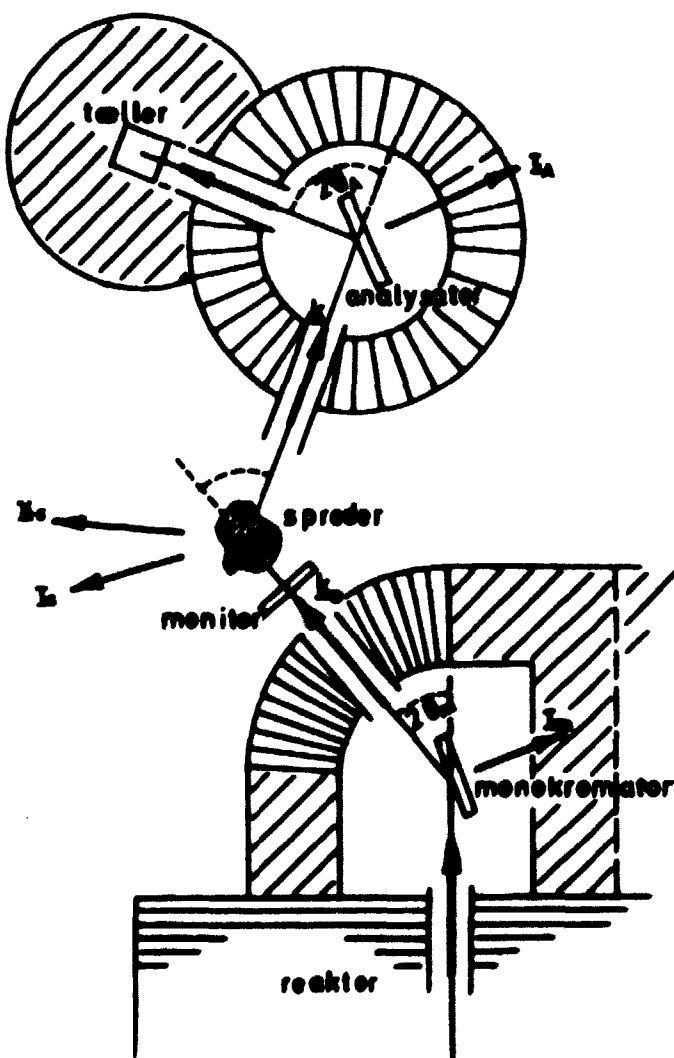


Fig. 4.5.1 Treaksespektrometer.

4.6 Spektrometerstyring

For hvert enkelt målepunkt skal de 3 vinkelarme, spreders rotation samt evt. temperatur og eksternt magnetfelt indstilles. Spektrometrene er styret af PDP8-computere, der beregner og indstiller vinklerne. En beskrivelse af programmer og det mekaniske og elektroniske udstyr findes ved hvert spektrometer.

4.7 Toakspektrometrets opløsningsevne

Under gennemgangen af monokromatorsystemet blev begrænsningerne i fastlæggelsen af \underline{k}_C 's retning og længde vist. Disse begrænsninger er af afgørende betydning for udseendet af de refleksioner der måles og instrumentets evne til at adskille refleksioner. Man siger, at instrumentet har en endelig opløsningseven.

Både for to- og treakspektrometret kan opløsningsevnen behandles analytisk. Det er de indledende trin i denne behandling, der er givet i afsnit 4.2. Vi skal ikke her fortsætte denne udledning, men blot give resultatet kvalitativt for toakspektrometret.

Toakspektrometrets opløsningsfunktion er en sandsynlighedsfordeling, der afhænger af

- 1) kollimation mellem reaktor og monokromator, monokromator og sample, sample og tæller
- 2) monokromatorkrystallens mosaikspredning
- 3) spredningsvektoren \underline{k} .

Sandsynlighedsfordelingen beskrives ved sin halv-værdi niveaukurve, der er en ellipse.

I fig. 4.7.1 og fig. 4.7.2 ses, hvorledes en variation af \underline{k} påvirker opløsningsevnen. Fig. 4.7.2 er en computerberegning af opløsningsellipsen, fig. 4.7.1 viser eksperimentelle resultater.

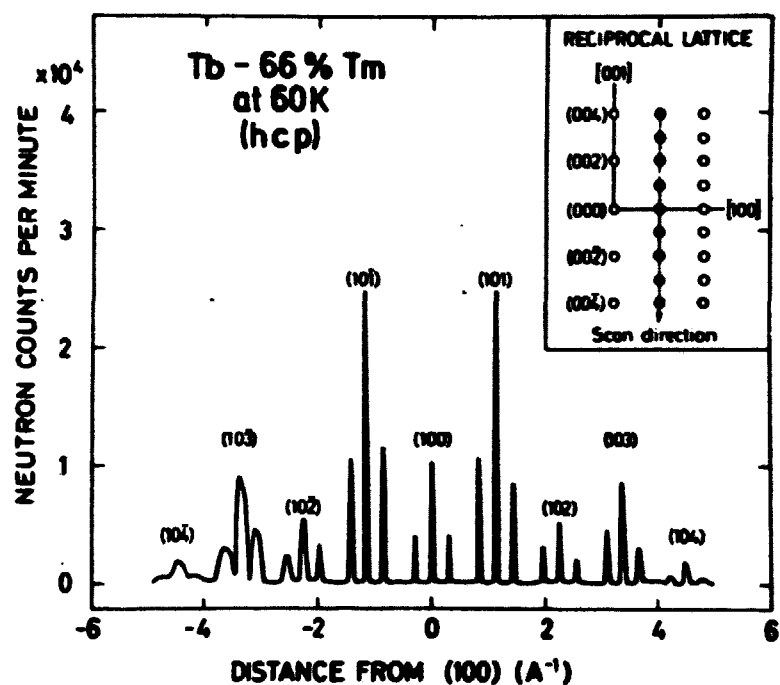


Fig. 4.7.1 Eksempel på måling langs en linie i det reciproke rum. Målingen viser hvorledes den instrumentelle opløsning indvirker på refleksionernes bredde.

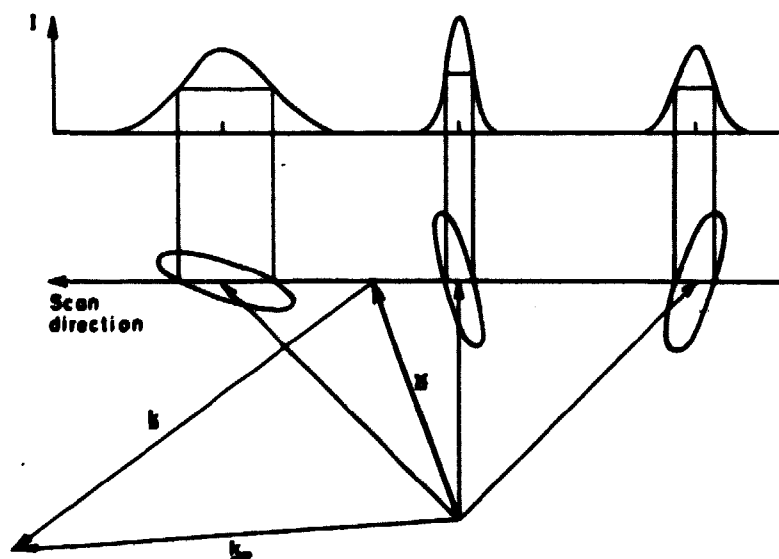


Fig. 4.7.2 En computer-beregning af de til fig. 4.7.1 hørende opløsningsellipser.

I fig. 4.7.3 ses, hvorledes en måling gennem et og samme Bragg-punkt "skifter udseende" afhængigt af den retning, man måler gennem punktet.

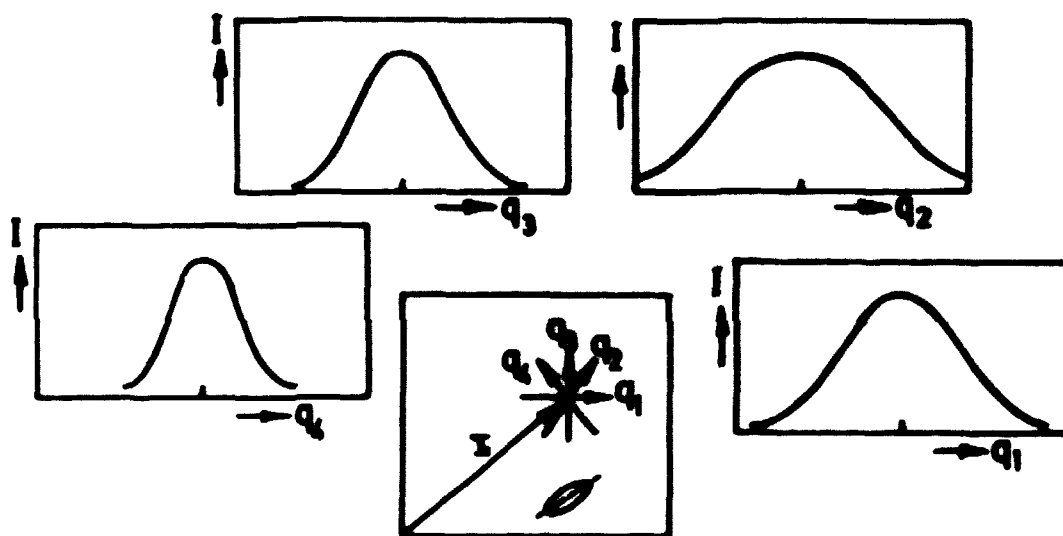


Fig. 4.7.3 Illustration af liniebreddens afhængighed af scanretning. Spektrometrets opløsnings ellipse er indtegnet forskudt fra målepunkterne i det reciprokke gitter.

De måleresultater, man får, fremkommer ved en foldning mellem opløsningsfunktionen og spredersens responsefunktion. I princippet kan vi altså efter en analytisk eller eksperimentel fastlæggelse af opløsningsfunktionen affolde måleresultaterne og bestemme spredersens responsefunktion. I praksis er det dog ofte vanskeligt at foretage denne affoldning.

5. REFERENCER

- G.E. Bacon, Neutron Diffraction (Clarendon Press, Oxford, 1962)
(New ed. in print)
- Ove Dietrich, Forelæsningsnoter i Neutronfysik (1967, Århus
Universitet)
- P.A. Egelstaff, Thermal Neutron Scattering (Academic Press,
London 1965)
- C. Kittel, Introduction to Solid State Physics (4th ed. 1971,
John Wiley & Sons)
- W. Marshall and S.W. Lovesey, Theory of Thermal Neutron Scattering
(1971, Oxford University Press)
- M. Nielsen and H. Bjerrum Møller, Resolution of a Triple Axis
Spectrometer, Acta Cryst., 25, 547-50 (1968)
- B. Lebech and M. Nielsen, Intensity and Resolution of a General
Scan in Reciprocal Space (Neutron Diffraction Con-
ference, Petten, 1975) RCN-234.